三维紧束缚模型

Jason Ts
jasonphysics19@gmail.com

2020 年 6 月 28 日

目录

Chapter 1

紧束缚模型简述

紧束缚模型是凝聚态物理中求解晶格能带的著名理论。通过二次量子化，能量-（电子）动量($E_{\vec{k}} - \vec{k}$)关系式可以求解。

1.1 （非）布拉维格子

晶体由晶格构成，晶格沿着初基矢量平移$\{\vec{R}_i\}$可以填充整个晶体。非布拉维格子的原子可以由以下式子完全遍历，

$$\sum_{h,k,l}\left(h\vec{R}_1 + k\vec{R}_2 + l\vec{R}_3\right) + \sum_j \vec{r}_j$$

在布拉维格子中，

$$\sum_{h,k,l}\left(h\vec{R}_1 + k\vec{R}_2 + l\vec{R}_3\right)$$

在三维布拉维格子的情形中，总共有7个晶系，14种格子。

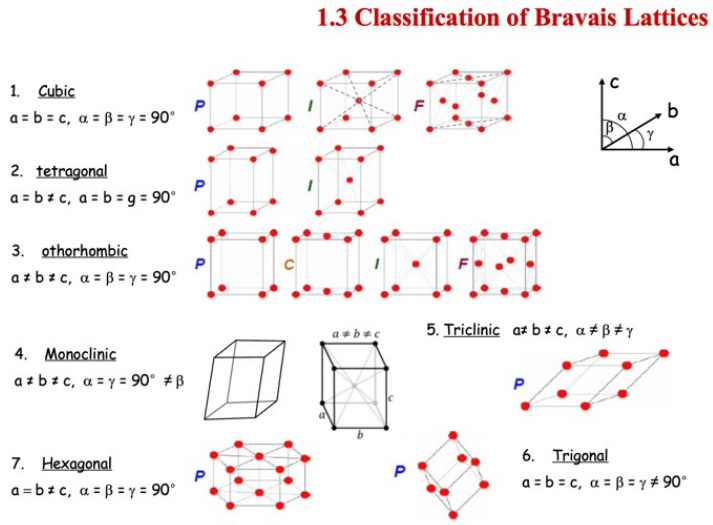

图 1.1: 3维布拉维格子

1.2 紧束缚模型-二次量子化

1.2.1 费米子

平面波	$\|\vec{k}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
布洛赫波	$\|n\vec{k}\rangle$	$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}(\vec{r})}$
瓦尼尔函数	$\|n_j\rangle$	$a_{nj}(\vec{r}-\vec{R})$

1.2.2 产生/湮灭算符

真空态 $\|0\rangle$	
产生算符	$a_j^\dagger$
湮灭算符	a_j
它们满足	

$$\begin{cases} a_j^\dagger|0\rangle = |j\rangle & a_j^\dagger|1_j\rangle = 0 \quad a_j^\dagger a_j^\dagger|0\rangle = 0 \\ (a_j)^2 = 0 & \left(a_j^\dagger\right)^2 = 0 \\ \begin{cases} \left[a_i, a_j^\dagger\right]_+ = \delta_{i,j} \\ [a_i, a_j]_+ = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right]_+ = 0 \end{cases} \end{cases}$$

推而广之，用$n_j(=0,1)$来表示在$|n_j\rangle$态下的原子数目。

$$|\cdots, n_{j-1}, n_j, n_{j+1}, \cdots\rangle = \prod_j (a_j^\dagger)^{n_j}|0\rangle$$

1.2.3 交换能

瓦尼尔函数$|\phi(\vec{r})$。两原子间交换能为

$$-J_{m,n} = \langle \phi(\vec{R}_m)|\Delta V|\phi(\vec{R}_n)\rangle$$

因此哈密顿量可以写成

$$\hat{H} = \sum_{h,k,l,j,\vec{k}} \varepsilon_{h,k,l,j,\vec{k}} C^{\dagger}_{h,k,l,j,\vec{k}} C_{h,k,l,j,\vec{k}}$$

其中$N_{h,k,l,j,\vec{k}} = C^{\dagger}_{h,k,l,j,\vec{k}} C_{h,k,l,j,\vec{k}}$是在轨道$(h,k,l,j)$上的粒子数目$(0/1)$，$C^{\dagger}_{h,k,l,j,\vec{k}}/C_{h,k,l,j,\vec{k}}$是产生/湮灭算符.

在紧束缚模型中，哈密顿量为

$$H = -t\sum_j \left(C^{\dagger}_j C_j + C^{\dagger}_{j+1} C_j\right) - t'\sum_j \left(C^{\dagger}_j C_{j+2} + C^{\dagger}_{j+2} C_j\right)$$

这只是在1维布拉维格子下的简化情形，这里写不下3维的。在紧束缚模型中，只有t这一项需要考虑。

1.2.4 傅里叶变换

$$\begin{cases} c^{\dagger}_{h,k,l,j,\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\left(h\vec{R}_1 + k\vec{R}_2 + l\vec{R}_3 + \vec{r}_j\right)} c^{\dagger}_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} \\ c_{h,k,l,j,\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\left(h\vec{R}_1 + k\vec{R}_2 + l\vec{R}_3 + \vec{r}_j\right)} c_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} \end{cases}$$

（仍然只考虑1维布拉维格子）

$$\begin{aligned} H &= -t_1 \sum_j \sum_k \sum_{k'} \left[e^{-ikja} c^{\dagger}_k e^{ik'(j+1)a} c_{k'} + e^{ik'(j+1)a} c^{\dagger}_{k'} e^{ikja} c_k\right] \frac{1}{V} \\ &= -t_1 \sum_k c^{\dagger}_k c_k (e^{ika} + e^{-ika}) \end{aligned}$$

Chapter 2

源代码组成

所有代码由python写成，共8份文件，包括7份7个晶系的文件和一个整合其他文件定义的类(class)的主要文件Lattice3D.py。所有单独的晶系.py文件可以单独运行。不过，建议使用Lattice3D.py文件，因为它不仅拥有每份.py所拥有的功能，还有一些诸如绘图和整理的函数可供使用。

这批文件基于**numpy**，**scipy**，**matplotlib**和**copy**。在使用它们之前确保都已经安装。

源代码已上传至Github

Chapter 3

如何使用

3.1 规范

3.1.1 晶格命名

晶格类型的名称依据下图所示

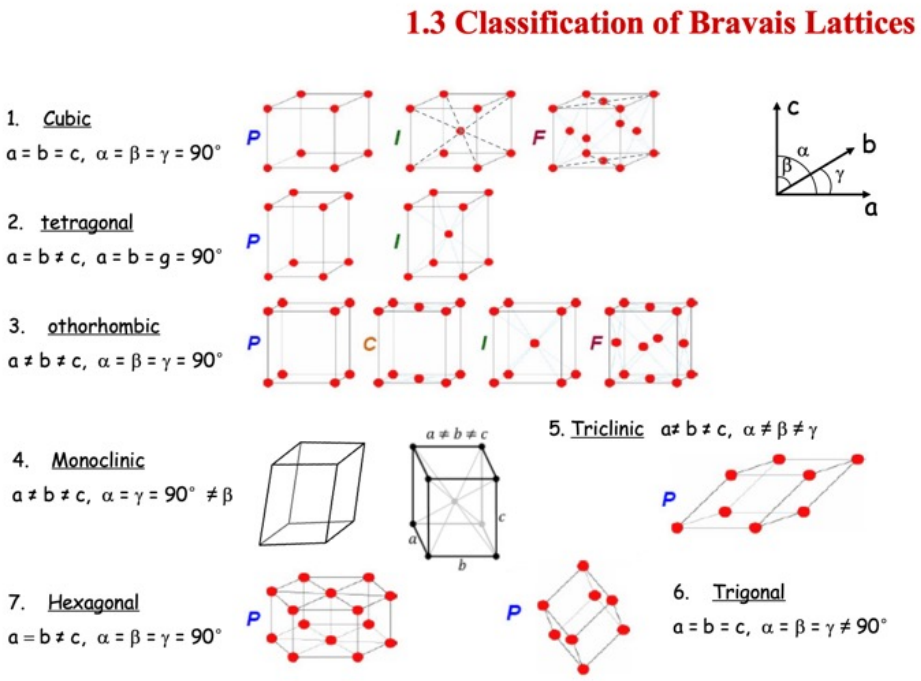

图 3.1: 3维布拉维格子

举个例子，第一种立方格子命名为*Cubic_1*，六角格子命名为*Hexagonal*。注意下划线。代码按照图中的

约定来使用长度和角度。

3.1.2 矢量表达方式

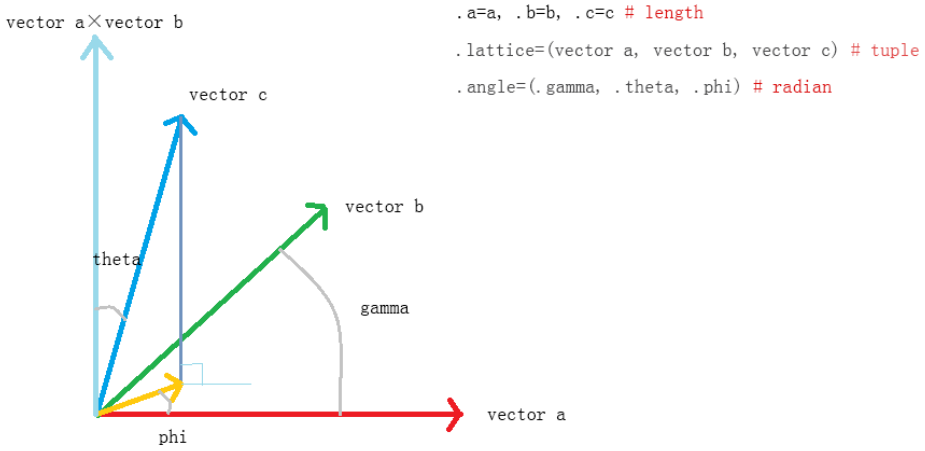

图 3.2: 矢量约定

假定晶格的边由3个矢量来定义：$\vec{a}$，$\vec{b}$和$\vec{c}$（六角格子$\vec{a}$和$\vec{b}$间的夹角是120°）。$\vec{a}$和$\vec{b}$在$x-y$平面中，$\vec{a}$平行于x轴。*alpha*，*beta*和*gamma*分别是$\vec{a}$，$\vec{b}$和$\vec{c}$之间的夹角，如图3.1右上角所示。利用$\vec{a}$，$\vec{b}$和$\vec{c}$的长度还有*gamma*，*theta*和*phi*角度可以确定晶格的形状。

3.2 如何使用类class Lattice

3.2.1 类class的赋值

由于在紧束缚模型中主要关注的是当晶格种类和晶格参数已知时晶格图像是什么样的，Lattice3D.py中Lattice (class)的输入如下

lat=Lattice(lattice='Triclinic',t=1,a=(1,2,3),angle=(60,30,45))

在变量*lattice*中输入的字符串是晶格的种类。*t*是交换能。*a*是$\vec{a}$，$\vec{b}$和$\vec{c}$的长度。变量*angle*中的3个角度是*gamma*，*theta*和*phi*。

Chapter 4

特色功能

4.1 第n近邻原子

*Lattice*不仅可以搜寻最近邻的原子，通过数变量t的长度（这意味着t的输入是一个元组/列表）n，它也会寻找第n近邻的原子。

$t_reverse$是一个确定是否排序/反排序的变量。默认值为None，表示不排序。

lat.order（在表格中）是一个元组。对其中每一个元素，它们包括4个部分，第一个是原子间长度，第二个包括了确定方向的角度，第三个是依据第二个的角度确定的坐标，第四个是变量t。

4.2 绘制能量-动量图

绘制能量-动量图（$E-\vec{k}$）。以$Plot2D$为例，如果变量$k=(None,0,0)$，它会绘制在$k_y=0$，$k_z=0$条件下$E-k_x$图。

Plot2D(lat.energy,k=(None,0,0))

4.3 绘制维格纳-赛茨元胞

绘制维格纳-赛茨元胞。输入类class(lat)或者初基矢量(lat.vector)。n是搜寻点的密度，它会影响图像转动视角的连贯性和元胞表面的闭合程度。$refine\_vec$：是否寻找最短的初基矢量（推荐）。

Plot_WS_cell(lat.vector,n=100)

4.4 绘制晶格

绘制3维晶格图像。输入类class(lat)或者初基矢量(lat.vector)。$layer$确定绘制多少晶格（$(2\times layer)^3$）。

PlotLattice(lat.vector,layer=1)